

Инструкция работы с программой Plate

Kochikov I.V., Kovtun D.M., Tarasov Y.I. A new software for processing the radial symmetric diffractograms // Вычислительные методы и программирование. Раздел 2. Программирование. 2008. Т. 9. С. 12-18. <http://num-meth.srcc.msu.su/index.html>

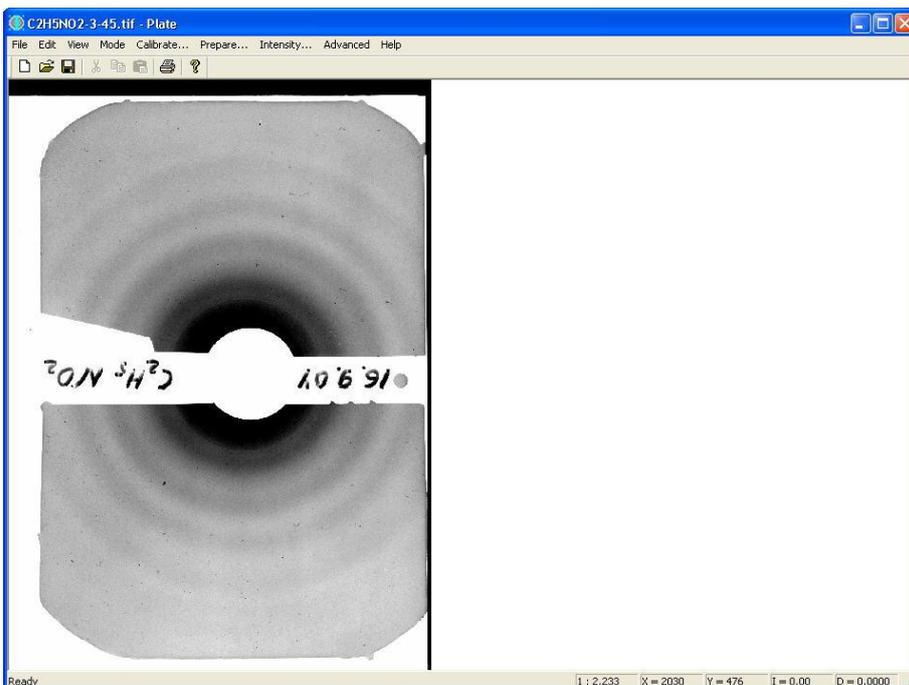
Исходный набор данных для работы с программой Plate:

- 1) Серия **tif**-файлов 16-bit (можно 8-bit, но хуже) без сжатия, полученных при обработке фотопластинок с помощью сканера или микрофотометра в каком-нибудь графическом редакторе без коррекции, или пленок image plates, полученных с помощью ридера с последующим преобразованием в вышеописанный **tif**-формат. Также можно работать с файлами **.bmp**. Серия должна содержать как пластинки со съемкой исследуемого вещества, так и стандарта для определения **длины волны**; стандарт может отсутствовать, если длина волны известна из других источников (?) (с точностью до 5 значащих цифр).
- 2) Калибровочная кривая для сканера (ридера) – файл с расширением **.clb** [перевод единиц отсчета сканера в единицы плотности почернения и наоборот].
- 3) Кривая нелинейности фотопластинки или другого носителя [кривая преобразования плотности почернения в интенсивность рассеяния].
- 4) Файл с данными используемого для определения длины волны стандарта.

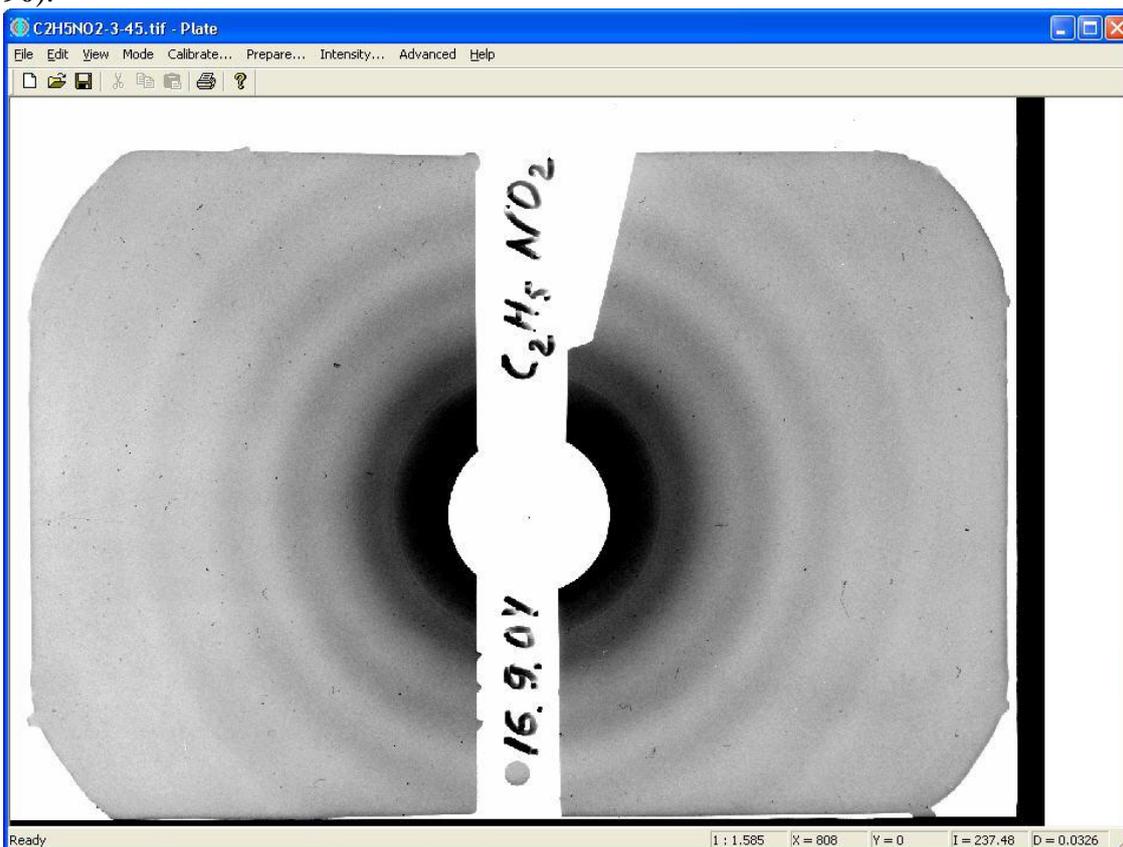
Порядок работы

Через меню **File -> Load calibration** загружаем файл калибровки сканера/ридера (**.clb**), с помощью которого получены картинки, затем сам **tif**-файл вещества. Первыми грузим "пластинки" стандарта, а уже потом работаем с пластинками исследуемого вещества. Эта последовательность связана с тем, что при обработке стандарта мы получаем искомую длину волны, которая вносится во внутреннюю базу данных [к БД имеется текстовый доступ через меню **Intensity -> Units.**] и сохраняется в ней всё время загрузки окна программы до следующего уточнения длины волны. При загрузке очередной "пластинки" калибровка сканера и длина волны наследуются, а **tif**-файл замещается новым. При работе с поименованным файлом создается файл с тем же именем и с расширением **.inf**. В нем содержатся (и постоянно обновляются) результаты всех действий с данным **tif**-файлом (кроме сведений о калибровке сканера), т.е. при очередной загрузке **tif**-файла с данным именем можно согласиться на использование предыдущих результатов (контрастирование и чистка изображения, температура пара, длина волны, позиция центра) и продолжить работу с "пластинкой".

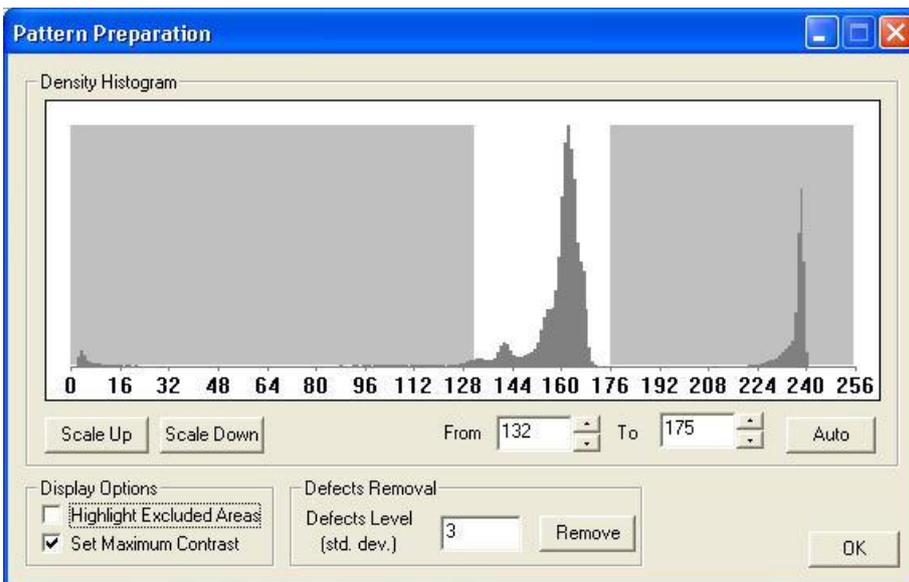
Вызвав меню **File -> Open**, загружаем новую пластинку (**tif**-файл):



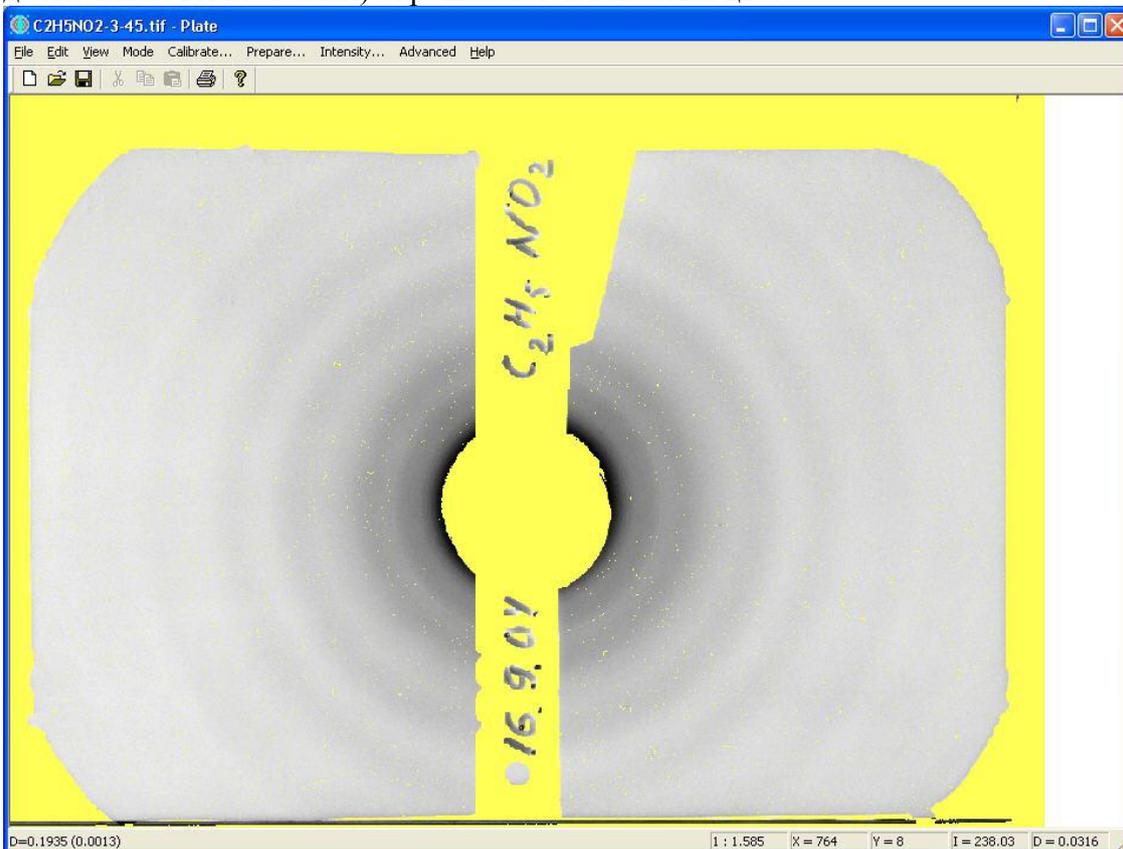
Рекомендуется позиционировать пластинку длинной стороной горизонтально, для чего через меню **Edit** можно выбрать соответствующую операцию поворота (например **Right 90**):



После загрузки новой "пластинки", замещающей в памяти предыдущую, её необходимо приготовить (меню **Prepare**->) появляется окно с гистограммой значений интенсивности в относительных величинах (0-255). С помощью стрелочек сужаем диапазон до значимых для эксперимента по рассеянию на ансамбле молекул величин, растягивая диапазон измеренных значений интенсивности на весь диапазон (0-255), галочкой **Set Maximum Contrast** контрастируем изображение. Это соответствует выделению основного "центрального" пика на гистограмме.

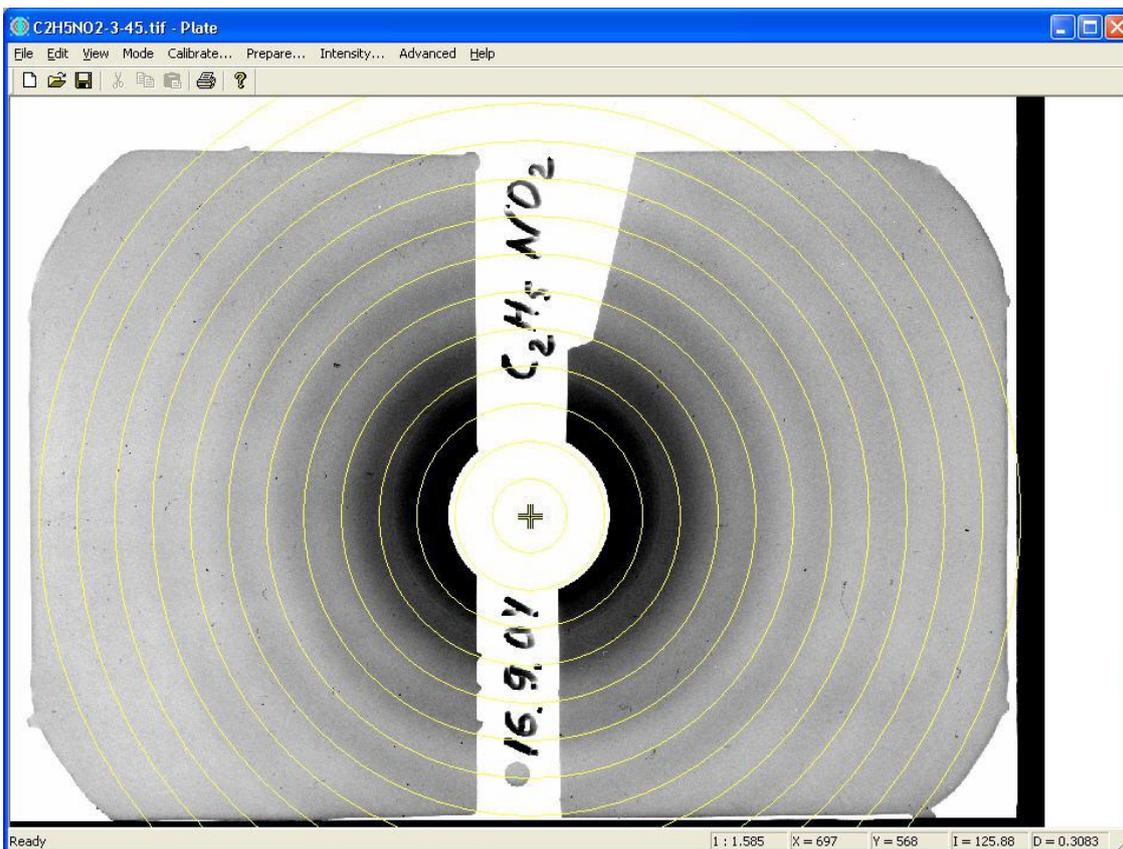


Далее жмём кнопку **Remove** (для удаления дефектов, критерий единицы std. dev.), можно поставить галочку **Highlight Excluded Areas**: выброшенные точки (не учитывающиеся в дальнейших вычислениях) окрашиваются в жёлтый цвет.

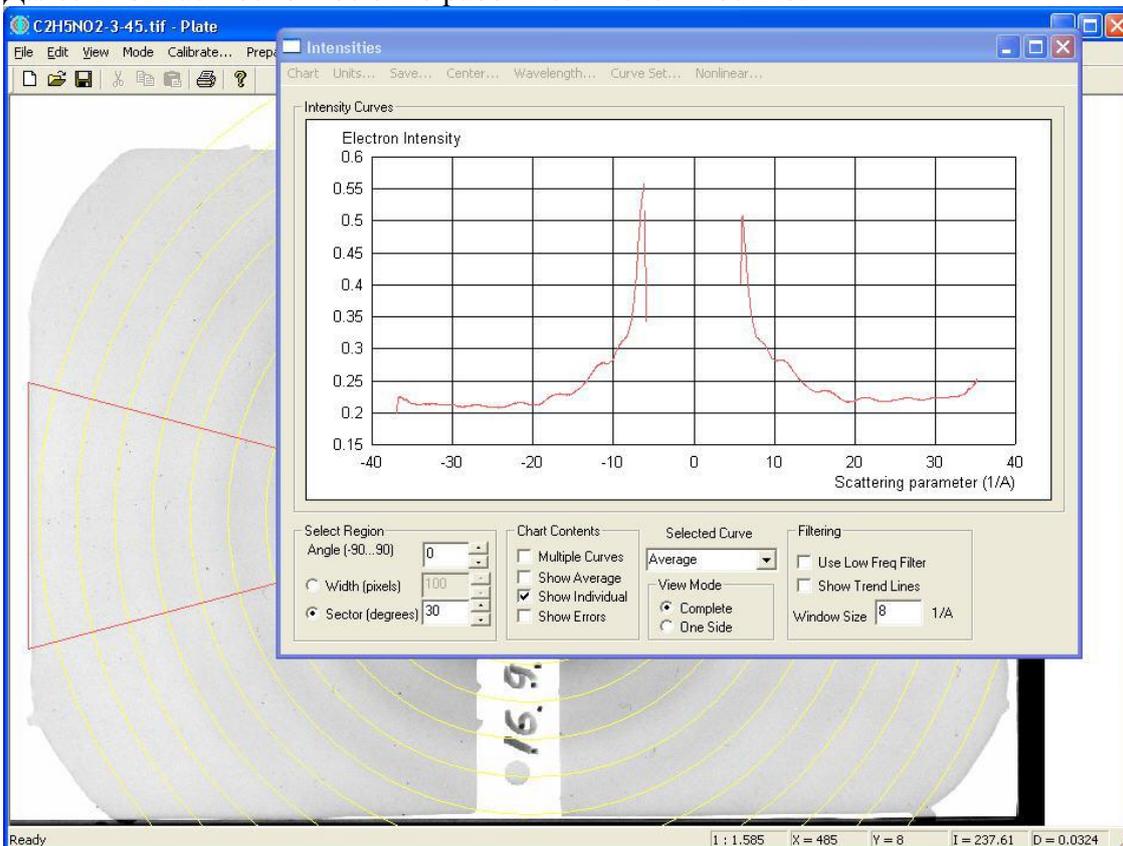


Закрываем это окно.

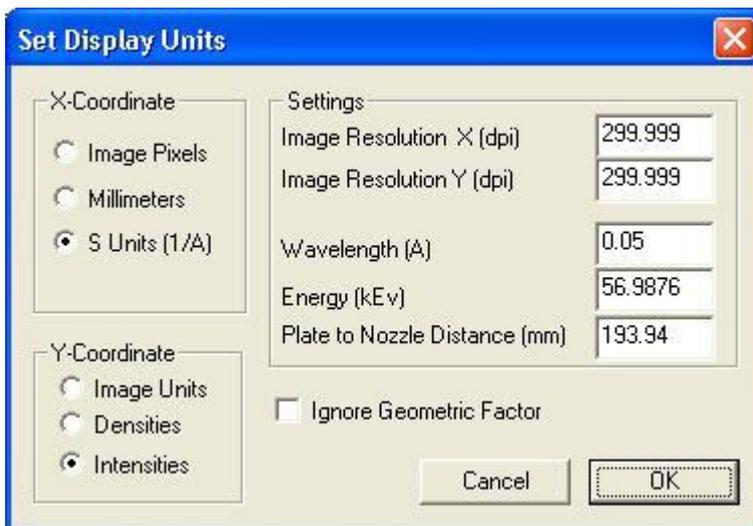
Переходим к меню **Intensity**. Если еще не указан центр, появляется предложение сделать это с помощью мышки, опираясь на аксиальную симметрию картинки. Этим же способом можно переприцелиться, т.е. подвигать центр.



Далее вызываем основное окно работы с интенсивностью.



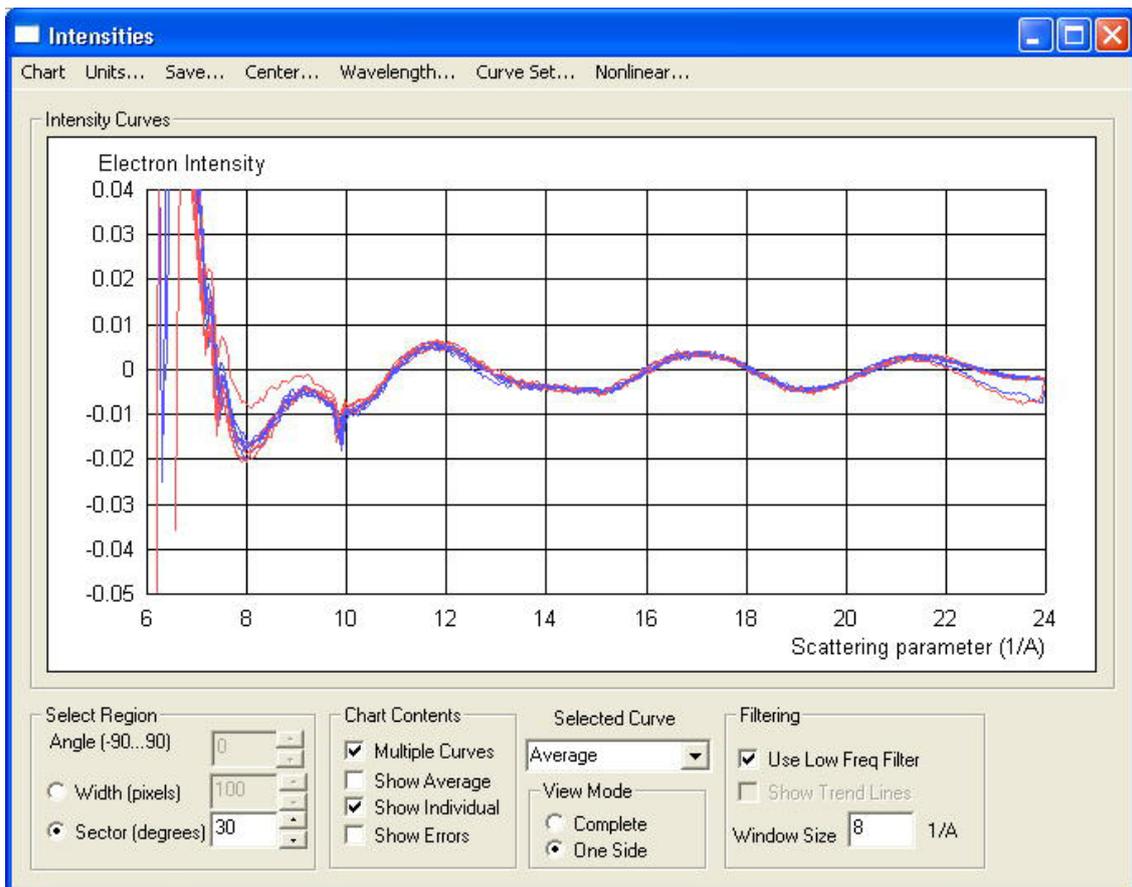
Перед дальнейшими шагами, входим в меню **Units**: вводим точное значение расстояния сопло-пластинка, а также значения других констант. В меню (окно) **Units** можно войти в любой момент работы с окном **Intensities**.



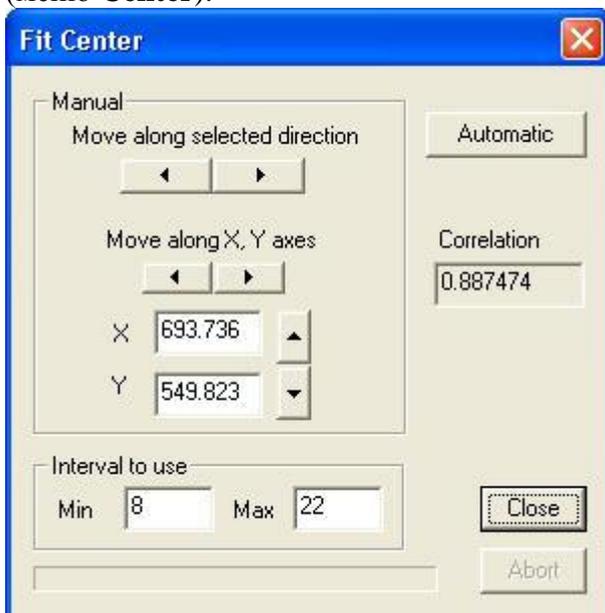
Меню в окне **Intensities** (все меню значимые при работе с пластинками):

- **Chart**: изменение и восстановление вида графиков интенсивности (**Chart/Zoom Auto**)
- **Units**: единицы измерения по осям (X, Y), разрешение картинки, длина волны (энергия), расстояние сопло - пластинка
- **Save**: диалог сохранения интенсивности и сетки по s в виде текстового файла.
- **Center**: диалоговое окно уточнения центра (авто и ручное).
- **Wavelength**: диалоговое окно уточнения длины волны (на пластинке съемки стандарта).
- **Curve Set**: диалоговое окно изменения набора используемых кривых, соответствующих различным секторам.
- **Nonlinear**: выбор кривой преобразования плотности почернения -> в интенсивность.

Выбираем сектор усреднения (по умолчанию 30 градусов), используем все сектора (сектора со средним направлением: -60, -30, 0, 30, 60 градусов; галочка **Multiple Curves**), совмещаем левые и правые стороны секторов (галочка **One Side**) и убираем низкочастотный тренд (галочка **Use Low Freq Filter**; этот режим годится для уточнения центра, но не для вычисления длины волны и кривой интенсивности рассеяния).



С помощью мышки выделяем прямоугольную область на графике, отсекая ненужные и шумные концы диапазона по s и увеличивая масштаб по оси ординат. Сначала уточняем положение центра дифракционной картинке, вызвав небольшое окошко (меню **Center**).



Автоматическая процедура поиска центра хорошо работает для пластинок с сильными кольцами и хорошим начальным приближением координат центра. Ручная процедура предпочтительнее: бегунками влево-вправо, вверх-вниз пытаемся добиться максимального значения коэффициента корреляции (окошко **Correlation**); осуществляем несколько циклов; критерий достижения: любое движение по горизонтали и вертикали должно приводить к уменьшению коэффициента (чем дальше, тем более заметно, т.к. используемый функционал имеет острый максимум в центре достаточно отчетливой

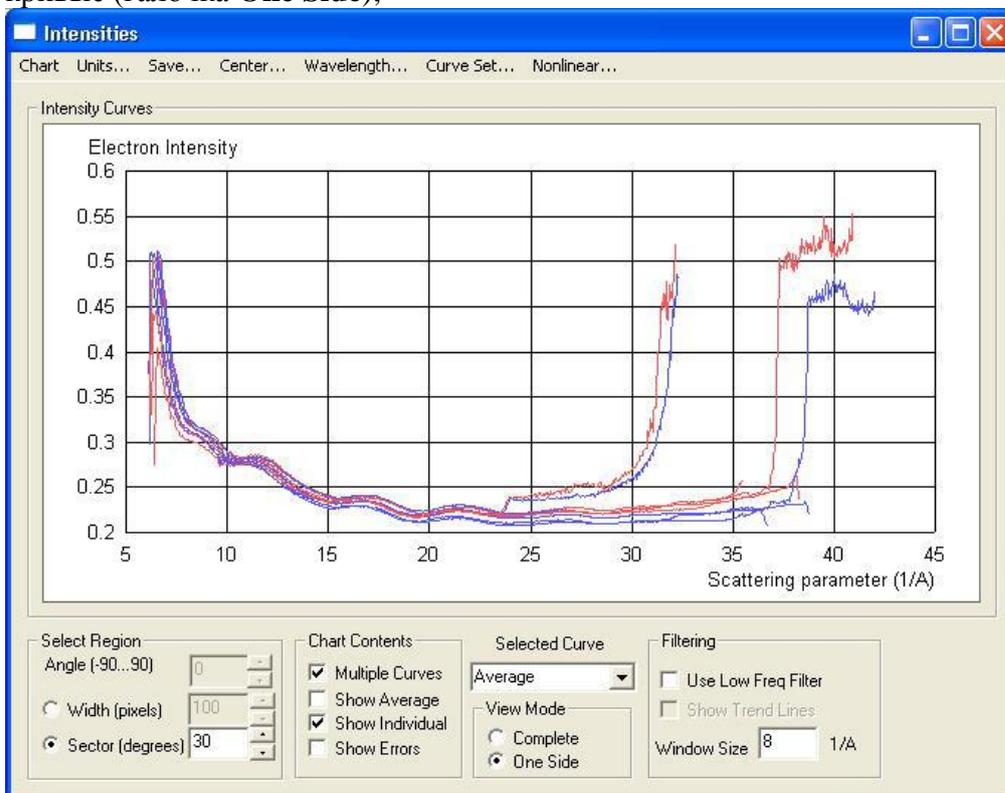
дифракционной картинке; к тому же ручное «шевеление» автоматически определенного центра позволяет оценить устойчивость и точность определения центра в каждом конкретном случае). Найдя центр, закрываем окошко и **не забываем убрать галочку с режима низкочастотного тренда Use Low Freq Filter** (во избежание дальнейшего неправильного расчета интенсивности рассеяния!).

Теперь можно определять **длину волны** (при этом в рабочей директории программы должны присутствовать файлы стандартов с расширением **.edm**). Кликаем меню **Wavelength** – программа пытается найти и загрузить все стандарты (**cbh6, ccl4, zno**) и диагностирует отсутствие любого из них. Появляется окошко **Wavelength Definition**: в выпадающем списке выбираем нужный стандарт, далее в соответствующее окошко вводим температуру эксперимента в градусах Цельсия, уточняем интервал (S_{min} , S_{max}) и шаг Δs , затем подбираем степени полиномов (**Background** и **Additive**) – жмем кнопку **Fit Wavelength** несколько раз, пока значение длины волны в окошке не стабилизируется; в процессе этого экспериментируем со степенями полиномов, анализируем значение R-фактора, и Back Error. Принимаем окончательное решение.

При выходе из окна уточнения длины волны, значение ее сохраняется до следующей процедуры уточнения (см. меню **Units**), и далее используется со всеми загружаемыми пластинками.

После определения длины волны, загружаем пластинки с интенсивностями исследуемого вещества: определяем центр (см. выше), после чего выбираем режим усреднения для сохранения интенсивности рассеяния в текстовый файл (далее приведены два равноценных варианта):

1) усредняем по всем 30-градусным секторам, поставив галочки в **Chart Contents (Multiple Curves**, для наглядности можно **Show Average** – сохраняется именно эта средняя кривая, если выбрано **Selected Curves -> Average**), совмещаем левые и правые кривые (галочка **One Side**);



2) усредняем по одному большому сектору (подгоняем бегунком или вводим размер сектора в градусах вручную), поставив галочки в **Chart Contents (Show Average** при выборе **Selected Curves -> Average**), совмещаем левые и правые кривые (галочка **One Side**).

Теперь можно перейти к диалогу сохранения интенсивности в текстовый файл через меню **Save**: будет предложено уточнить значение интервала (s_{min} , s_{max}) и величины шага Δs . Вывод выглядит следующим образом:

```
***** Plate 1.0 Scanned image processing results *****
=== Input data ===
Input file name: D:\Chemistry\Fon\Images\04.sep.16_nitroetan\C2H5NO2-3-45.tif
Calibration file name: Unknown.clb
=== Preprocessing ===
Valid scanner intensity range: From 90 to 175
Noise points suppressed at level 3.000 sigma
=== Scaling ===
Wavelength = 0.050000 Angstrom
Plate to nozzle distance = 193.940 mm
=== Adjustment ===
Picture center detected at (693.736 549.823) pixels
=== Used Area ===
Sector(s) 90 degrees wide
=== Averaging ===
Left and right curves averaged
sMin= 7.000
sMax=30.000
sStep= 0.200
0.402224 0.372702 0.352073 0.342116 0.328196 0.320344 0.316413 0.313334
0.311412 0.309373 0.306141 0.302721 0.297736 0.292528 0.285025 0.283184
0.281248 0.279646 0.279142 0.279668 0.280317 0.280316 0.279602 0.278296
0.276608 0.273944 0.270407 0.266818 0.263056 0.259319 0.255367 0.252201
0.248984 0.246458 0.244115 0.241876 0.240036 0.238021 0.236014 0.234552
0.233213 0.231963 0.231673 0.232024 0.232416 0.232998 0.233322 0.233875
0.233943 0.233665 0.233438 0.232402 0.231362 0.230012 0.228147 0.226324
0.224259 0.222450 0.220675 0.219032 0.217862 0.217092 0.216645 0.216941
0.217305 0.217913 0.218959 0.219925 0.221013 0.222042 0.222909 0.223126
0.223408 0.223384 0.223036 0.222444 0.221661 0.220759 0.219935 0.218944
0.218264 0.217504 0.216958 0.216535 0.216485 0.216297 0.216471 0.216851
0.217094 0.217555 0.217905 0.218204 0.218721 0.219223 0.219807 0.220219
0.220726 0.221071 0.221315 0.221606 0.221639 0.221297 0.220982 0.220254
0.219697 0.218957 0.218348 0.218103 0.217993 0.218166 0.218530 0.219154
0.219852 0.220621 0.220892 0.221054

7.000      0.402224  0.000648
7.200      0.372702  0.000518
7.400      0.352073  0.000442
7.600      0.342116  0.000407
7.800      0.328196  0.000363
8.000      0.320344  0.000305
8.200      0.316413  0.000265
```

(остальная часть файла опущена)

Данные представлены в двух форматах: первый – последовательный набор интенсивностей, второй состоит из трех колонок: параметр рассеяния (s), измеренная интенсивность и ее стандартное отклонение, полученное в процедуре усреднения.

Важное замечание: перед сохранением кривых интенсивности необходимо удостовериться, что снята галочка “**Use Low Freq Filter**” (так как эта опция используется при определении центра для каждой новой пластинки).

Калибровка характеристики сканера.

Это можно сделать с использованием стандартной фотографической серой шкалы (фотоклин). Файл калибровки должен содержать следующую информацию (для примера):

Calibration Curve created on Mon Jan 08 15:15:59 2007

Density Image Value

0.000 221.97

0.250 145.13

0.500 98.19

0.750 67.71

1.000 47.76

1.250 32.48

1.500 20.95

1.750 14.37

2.000 9.81
2.250 6.49
2.500 4.24
2.750 2.94
3.000 1.92

Первые три строки файла игнорируются, остальные содержат величины плотностей почернения фотоклина и соответствующие им значения, измеренные сканером (0...256).
Файл должен иметь расширение “.clb”; пример такого файла включен в сопровождение программы.

См. также версию инструкции на английском языке.